

Novel Phospholyl(diphenylphosphino)methane-ruthenium Complexes:
Unexpected non-assisted *cis* to *trans* Isomerization of $[\text{RuCl}_2(\kappa^2\text{-P-P}')_2]$.^a

Duc Hanh Nguyen, Jean-Claude Daran, Sonia Ladeira, Thomas Davin, Laurent Maron
Martine Urrutigoity, Philippe Kalck, and Maryse Gouygou

Supporting Informations

X-ray data

Computational data

X-ray data

Table 1. Crystal data for **3** and **4**.

Identification code	3	4
Empirical formula	C ₅₀ H ₄₀ Cl ₂ P ₄ Ru, CH ₂ Cl ₂	C ₅₀ H ₄₀ Cl ₂ P ₄ Ru
Formula weight	1021.60	936.68
Temperature, K	180(2)	180(2)
Wavelength, Å	0.71073	0.71073
Crystal system	Tetragonal	Triclinic
Space group	I 41/a	P -1
a, Å	25.8002(14)	10.0456(3)
b, Å	25.8002(14)	10.8211(4)
c, Å	35.4669(18)	11.5003(4)
α, °	90	103.090(3)
β, °	90	94.498(3)
γ, °	90	117.213(4)
Volume, Å ³	23609(2)	1058.70(6)
Z	16	1
Density (calc), Mg/m ³	1.15	1.469
Abs. coefficient, mm ⁻¹	0.583	0.683
F(000)	8320	478
Crystal size, mm ³	0.4 x 0.08 x 0.08	0.25 x 0.20 x 0.10
Theta range, °	0.98 to 25.35.	3.27 to 27.48
Reflections collected	155458	23232
Indpt reflections (R _{int})	10818 (0.141)	4800 (0.0262)
Completeness, %	100.0	99.3
Absorption correction	Multi-scan	Multi-scan
Max. and min. transmission	0.954 and 0.946	1.0 and 0.951

Refinement method	F ²	F ²
Data /restraints/parameters	10818 / 204 / 580	4800 / 0 / 259
Goodness-of-fit on F ²	0.984	1.070
R1, wR2 [I>2σ(I)]	0.0585, 0.1351	0.0216, 0.0552
R1, wR2 (all data)	0.1086, 0.1492	0.0262, 0.0561
Residual density, e.Å ⁻³	0.503 and -0.559	0.401 / -0.375

Computational data.

Complex Ru, Cl in trans phosphole in trans, 1:

E : -4309.3426

G : -4308.6769

H : -4308.5340

Ru	2.097614	3.115373	5.475708
Cl	2.356039	1.001143	4.266461
P	0.175604	3.411211	4.157942
P	0.286650	2.100193	6.596520
C	-0.889246	4.896263	4.100221
C	-1.363410	5.130535	2.791864
C	-0.909244	4.130294	1.813344
C	-0.086358	3.129062	2.369700
C	-0.773540	2.078659	5.062139
H	-0.534309	1.137885	4.553262
H	-1.859574	2.186951	5.137860
C	-1.215846	5.763567	5.141490
H	-0.813392	5.600428	6.135519
C	-2.041228	6.859354	4.879991
H	-2.301405	7.539936	5.686430
C	-2.520928	7.090403	3.589587
H	-3.158967	7.949064	3.395065
C	-2.182441	6.234253	2.543218
H	-2.556062	6.429534	1.541237
C	0.418144	2.098765	1.577450
H	1.058790	1.342659	2.022864
C	0.097319	2.066639	0.218792

H	0.483088	1.265337	-0.406295
C	-0.713566	3.057317	-0.338871
H	-0.956291	3.025631	-1.398184
C	-1.216818	4.088871	0.451121
H	-1.847929	4.853248	0.004893
C	-0.656106	3.012598	7.881492
C	-1.999939	3.381466	7.757654
H	-2.550754	3.168944	6.846487
C	-2.654815	4.037041	8.801821
H	-3.699075	4.317693	8.688482
C	-1.974783	4.327316	9.981744
H	-2.485621	4.836558	10.795142
C	-0.633221	3.966384	10.112716
H	-0.092201	4.196803	11.026897
C	0.022840	3.320968	9.069463
H	1.072104	3.058762	9.174191
C	0.258207	0.390131	7.271242
C	-0.923232	-0.153791	7.795868
H	-1.832836	0.441396	7.821750
C	-0.935459	-1.449365	8.304703
H	-1.856522	-1.862233	8.708923
C	0.234093	-2.211399	8.303713
H	0.224698	-3.221604	8.705877
C	1.412027	-1.674714	7.788967
H	2.325844	-2.263196	7.783809
C	1.426465	-0.379330	7.271178
H	2.335791	0.028312	6.842212
Cl	1.839201	5.229594	6.684972
P	4.019614	2.819563	6.793489
P	3.908576	4.130554	4.354891
C	5.084465	1.334513	6.851274
C	5.558611	1.100288	8.159646
C	5.104429	2.100562	9.138126
C	4.281549	3.101771	8.581723
C	4.968767	4.152095	5.889272
H	4.729540	5.092878	6.398134
H	6.054801	4.043797	5.813553
C	5.411080	0.467171	5.810041
H	5.008640	0.630272	4.816001
C	6.236463	-0.628604	6.071591
H	6.496653	-1.309215	5.265180
C	6.716145	-0.859606	7.362010
H	7.354184	-1.718258	7.556571

C	6.377642	-0.003420	8.408343
H	6.751249	-0.198664	9.410337
C	3.777027	4.132094	9.373926
H	3.136385	4.888181	8.928474
C	4.097828	4.164270	10.732588
H	3.712044	4.965591	11.357641
C	4.908709	3.173614	11.290299
H	5.151415	3.205339	12.349616
C	5.411980	2.142034	10.500353
H	6.043085	1.377675	10.946619
C	4.851334	3.218150	3.069919
C	6.195169	2.849288	3.193754
H	6.745986	3.061813	4.104918
C	6.850045	2.193715	2.149585
H	7.894307	1.913068	2.262922
C	6.170012	1.903437	0.969664
H	6.680849	1.394197	0.156265
C	4.828447	2.264364	0.838695
H	4.287426	2.033943	-0.075484
C	4.172387	2.909778	1.881950
H	3.123122	3.171981	1.777223
C	3.937017	5.840612	3.680162
C	5.118456	6.384534	3.155536
H	6.028062	5.789349	3.129662
C	5.130682	7.680105	2.646695
H	6.051746	8.092973	2.242476
C	3.961129	8.442136	2.647675
H	3.970522	9.452339	2.245505
C	2.783194	7.905450	3.162419
H	1.869375	8.493930	3.167569
C	2.768757	6.610069	3.680215
H	1.859430	6.202426	4.109178

Complex Ru, Cl I ntrans, phosphole in cis, **2**:

E: -4309.3404

G: -4308.6721

H: -4308.5314

Ru	2.511572	4.130591	4.148095
Cl	2.736708	1.998697	2.946230
P	0.734707	4.529571	2.684798
P	0.555770	3.173094	5.089826

C	-0.274382	6.049840	2.580193
C	-0.606675	6.343314	1.241192
C	-0.072954	5.371020	0.274398
C	0.661006	4.324280	0.870277
C	-0.357960	3.227313	3.462806
H	-0.135518	2.282343	2.955080
H	-1.435816	3.412382	3.448000
C	-0.702746	6.875867	3.617102
H	-0.415382	6.662406	4.640776
C	-1.480702	7.996009	3.317355
H	-1.818362	8.645737	4.120578
C	-1.815131	8.289930	1.994430
H	-2.417065	9.167266	1.770210
C	-1.380189	7.470436	0.954692
H	-1.644912	7.711025	-0.071808
C	1.238305	3.323285	0.091658
H	1.814850	2.535751	0.567722
C	1.071998	3.360298	-1.293976
H	1.518579	2.584079	-1.909914
C	0.343548	4.391345	-1.890212
H	0.222265	4.413849	-2.970493
C	-0.227344	5.397633	-1.113531
H	-0.787889	6.197511	-1.590733
C	-0.467914	4.100935	6.299311
C	-1.841568	4.325344	6.145576
H	-2.359959	3.992776	5.250689
C	-2.566880	4.986501	7.136492
H	-3.632400	5.155431	7.001380
C	-1.927410	5.428232	8.293262
H	-2.493089	5.943959	9.065367
C	-0.558461	5.214636	8.452154
H	-0.048883	5.568476	9.344494
C	0.169354	4.562713	7.459932
H	1.240142	4.425733	7.577612
C	0.387493	1.447067	5.703814
C	-0.871471	0.859238	5.886961
H	-1.774878	1.423471	5.669070
C	-0.977584	-0.444545	6.363806
H	-1.959225	-0.891583	6.500211
C	0.172978	-1.172258	6.671484
H	0.089132	-2.189462	7.046078
C	1.427573	-0.592066	6.497993
H	2.327500	-1.155058	6.732747

C	1. 534404	0. 711017	6. 012603
H	2. 509396	1. 159016	5. 853553
Cl	2. 205681	6. 262862	5. 312767
P	4. 350840	5. 148936	3. 145917
P	4. 371768	3. 910476	5. 629093
C	4. 454337	6. 781293	2. 330959
C	5. 286977	6. 728025	1. 194081
C	5. 862589	5. 396387	0. 947433
C	5. 467221	4. 426803	1. 892491
C	5. 328774	5. 249975	4. 742249
H	5. 102188	6. 222846	5. 187850
H	6. 411274	5. 109886	4. 666188
C	3. 810985	7. 962990	2. 692304
H	3. 153993	7. 974651	3. 557355
C	4. 015154	9. 109304	1. 921950
H	3. 517749	10. 036519	2. 194381
C	4. 845546	9. 066622	0. 800341
H	4. 996079	9. 963419	0. 204252
C	5. 479364	7. 881720	0. 430589
H	6. 116695	7. 860513	-0. 449776
C	5. 905273	3. 109436	1. 785541
H	5. 565651	2. 360484	2. 492470
C	6. 764378	2. 759545	0. 742050
H	7. 111460	1. 733570	0. 651935
C	7. 167477	3. 717034	-0. 190124
H	7. 832867	3. 434800	-1. 002378
C	6. 717284	5. 032515	-0. 095456
H	7. 031295	5. 766821	-0. 832935
C	5. 586028	2. 521504	5. 691581
C	6. 813048	2. 699556	6. 351827
H	7. 036571	3. 646649	6. 837706
C	7. 743434	1. 666743	6. 406450
H	8. 689429	1. 818653	6. 920385
C	7. 459869	0. 437400	5. 807053
H	8. 186652	-0. 370048	5. 852027
C	6. 245718	0. 251499	5. 152265
H	6. 019821	-0. 700907	4. 678898
C	5. 310307	1. 287939	5. 091553
H	4. 378855	1. 152429	4. 547834
C	4. 290670	4. 353700	7. 416371
C	4. 325829	5. 675143	7. 877513
H	4. 420145	6. 496968	7. 177400
C	4. 210408	5. 951808	9. 239733

H	4. 244829	6. 983882	9. 579565
C	4. 044854	4. 917260	10. 158127
H	3. 954125	5. 136534	11. 219066
C	3. 996009	3. 598077	9. 707903
H	3. 866488	2. 782307	10. 414691
C	4. 119955	3. 318660	8. 349066
H	4. 094007	2. 284840	8. 014341

Complex Ru, Cl cis, Phosphole trans, **3**:

E: -4309.3294

G: -4308.6600

H: -4308.5205

C	17. 538585	5. 908987	19. 393644
P	17. 742241	5. 146915	21. 059681
C	19. 477344	4. 533796	20. 839955
C	19. 771663	3. 766596	19. 701089
C	21. 059925	3. 291594	19. 473214
C	22. 084271	3. 574564	20. 378367
C	21. 805358	4. 332382	21. 513159
C	20. 512772	4. 808645	21. 742049
C	18. 433197	6. 903430	18. 975548
C	18. 316048	7. 470628	17. 709170
C	17. 313606	7. 036686	16. 841104
C	16. 426402	6. 042435	17. 248162
C	16. 531997	5. 486256	18. 522321
Ru	15. 940272	4. 220070	22. 225881
Cl	13. 933895	4. 056411	23. 626520
C	17. 896385	6. 571144	22. 261114
P	16. 961587	5. 750739	23. 658785
C	18. 178615	5. 458883	24. 995344
C	17. 962384	6. 339453	26. 076161
C	18. 801282	6. 277490	27. 191418
C	19. 838730	5. 347694	27. 227796
C	20. 039655	4. 466903	26. 163995
C	19. 201379	4. 516457	25. 048220
C	16. 815284	7. 240098	25. 880686
C	16. 158886	7. 056752	24. 647232
C	15. 025153	7. 795824	24. 319858
C	14. 559499	8. 750819	25. 225309
C	15. 213963	8. 951437	26. 442322
C	16. 337092	8. 197513	26. 777758
Cl	14. 801584	6. 150546	21. 229569

P	16. 334878	2. 096302	23. 123330
C	14. 925699	1. 330210	22. 163539
P	14. 910047	2. 643402	20. 834225
C	15. 541193	1. 811835	19. 331285
C	14. 522152	1. 667763	18. 366691
C	14. 815332	1. 054012	17. 145951
C	16. 104654	0. 586107	16. 899480
C	17. 107888	0. 725911	17. 860699
C	16. 828577	1. 344796	19. 080602
C	13. 223774	2. 210085	18. 799826
C	13. 247139	2. 758229	20. 098794
C	12. 116277	3. 356362	20. 649087
C	10. 935008	3. 371899	19. 905601
C	10. 896537	2. 812952	18. 626202
C	12. 035912	2. 238024	18. 065777
C	17. 728428	0. 946000	22. 733718
C	18. 978059	1. 426348	22. 339887
C	20. 035343	0. 546414	22. 092461
C	19. 847452	-0. 825357	22. 233040
C	18. 601773	-1. 317499	22. 629835
C	17. 553432	-0. 439281	22. 884200
C	16. 104057	1. 666398	24. 905027
C	17. 240523	1. 524471	25. 714143
C	17. 117592	1. 223791	27. 068453
C	15. 855808	1. 049031	27. 633850
C	14. 720617	1. 184076	26. 837334
C	14. 840151	1. 497197	25. 484311
H	18. 647537	6. 947993	28. 032933
H	17. 254753	7. 369907	21. 874352
H	13. 999256	1. 440217	22. 733253
H	14. 515110	7. 610670	23. 378808
H	13. 674431	9. 333301	24. 983325
H	14. 839734	9. 695247	27. 141495
H	16. 828273	8. 353596	27. 734968
H	20. 489755	5. 303273	28. 097328
H	20. 842042	3. 734828	26. 206872
H	19. 343685	3. 814619	24. 231349
H	18. 890801	6. 968771	22. 483244
H	20. 326807	5. 396894	22. 634905
H	22. 595258	4. 566781	22. 222557
H	23. 093073	3. 213420	20. 194894
H	21. 267070	2. 707949	18. 579675
H	19. 009897	8. 248158	17. 399207

H	17. 223191	7. 476644	15. 850964
H	15. 637109	5. 706631	16. 580694
H	15. 814858	4. 742838	18. 850996
H	17. 608896	1. 456510	19. 828395
H	18. 109005	0. 353289	17. 659882
H	16. 329223	0. 107531	15. 949513
H	14. 043632	0. 936645	16. 389424
H	19. 125007	2. 492984	22. 213972
H	20. 999207	0. 942529	21. 785676
H	20. 667003	-1. 512571	22. 037763
H	18. 449914	-2. 387632	22. 747080
H	18. 011124	1. 122300	27. 679209
H	15. 758005	0. 809550	28. 689823
H	13. 731425	1. 054585	27. 269059
H	13. 944906	1. 638023	24. 891064
H	15. 054388	0. 297976	21. 826209
H	11. 994814	1. 820137	17. 062983
H	9. 971872	2. 835258	18. 054685
H	10. 043701	3. 833438	20. 322284
H	12. 174107	3. 810991	21. 634134
H	16. 597053	-0. 833800	23. 219171
H	18. 231634	1. 639614	25. 285469
H	18. 990400	3. 556948	18. 975138
H	19. 230222	7. 234124	19. 637870

Complex Ru, Cl cis, Phosphine trans, **4**:

E: -4309. 3438

G: -4308. 6734

H: -4308. 5345

P	16. 868953	1. 956694	23. 245762
C	16. 295992	3. 626497	22. 737283
C	15. 106893	4. 152636	23. 252333
H	14. 528721	3. 571881	23. 963529
C	14. 675588	5. 415666	22. 844752
H	13. 750846	5. 819494	23. 248988
C	15. 417616	6. 152028	21. 924278
H	15. 074494	7. 134171	21. 607643
C	16. 605711	5. 629792	21. 409674
H	17. 191191	6. 202402	20. 694425
C	17. 046617	4. 374587	21. 818449
H	17. 982896	3. 981978	21. 428103
C	18. 628633	2. 293057	23. 658620

C	19. 711689	1. 976465	22. 829889
H	19. 554681	1. 466734	21. 884197
C	21. 014067	2. 304270	23. 210058
H	21. 843993	2. 051710	22. 554590
C	21. 249021	2. 953225	24. 419963
H	22. 264018	3. 207761	24. 714594
C	20. 175917	3. 274210	25. 252097
H	20. 348804	3. 773410	26. 201615
C	18. 876825	2. 946588	24. 875060
H	18. 045389	3. 199551	25. 527132
C	16. 851508	0. 910583	21. 706710
H	17. 724147	0. 888611	21. 047899
H	15. 965596	1. 222317	21. 143340
C	17. 948774	-1. 672639	22. 461861
C	19. 166087	-1. 455811	23. 100512
H	19. 276256	-0. 644242	23. 812779
C	20. 246499	-2. 295824	22. 825330
H	21. 198090	-2. 129796	23. 322656
C	20. 099846	-3. 355726	21. 929179
H	20. 942526	-4. 011306	21. 723700
C	18. 880907	-3. 582277	21. 292647
H	18. 781954	-4. 407709	20. 592239
C	17. 798593	-2. 736843	21. 549946
C	16. 465653	-2. 794455	20. 930267
C	16. 021510	-3. 724639	19. 986987
H	16. 674085	-4. 528126	19. 654782
C	14. 734822	-3. 615513	19. 463763
H	14. 392227	-4. 337595	18. 726541
C	13. 887761	-2. 583178	19. 873204
H	12. 888498	-2. 501467	19. 453196
C	14. 317006	-1. 651764	20. 820575
H	13. 669171	-0. 845674	21. 154231
C	15. 602056	-1. 761744	21. 349047
C	11. 870238	-1. 772582	27. 064984
H	12. 408189	-2. 644155	27. 430736
C	10. 566385	-1. 543212	27. 494331
H	10. 101637	-2. 226654	28. 200874
C	9. 857650	-0. 441863	27. 011199
H	8. 837416	-0. 264746	27. 343333
C	10. 457578	0. 426293	26. 101972
H	9. 908622	1. 284079	25. 721930
C	11. 767679	0. 207625	25. 673984
H	12. 241629	0. 884901	24. 971079

C	14. 158034	-2. 976206	25. 188279
C	14. 577838	-4. 004451	26. 041183
H	15. 003216	-3. 777056	27. 013999
C	14. 462740	-5. 339729	25. 652334
H	14. 794800	-6. 125544	26. 326448
C	13. 924164	-5. 663966	24. 409006
H	13. 836117	-6. 704628	24. 107198
C	13. 499870	-4. 647095	23. 553292
H	13. 084282	-4. 888055	22. 578666
C	13. 616140	-3. 314587	23. 939447
H	13. 285784	-2. 528263	23. 266635
C	17. 967587	-1. 728623	26. 306226
C	17. 906458	-2. 963757	25. 667095
H	17. 093030	-3. 192927	24. 985965
C	18. 904790	-3. 910270	25. 902773
H	18. 859259	-4. 875820	25. 406737
C	19. 966397	-3. 611999	26. 758451
H	20. 745322	-4. 350297	26. 932628
C	20. 036500	-2. 374685	27. 395783
H	20. 864185	-2. 157924	28. 066354
C	19. 031908	-1. 427693	27. 180312
C	18. 915475	-0. 104768	27. 812912
C	19. 804122	0. 463985	28. 728785
H	20. 706979	-0. 065056	29. 023208
C	19. 524903	1. 714973	29. 274593
H	20. 214679	2. 154093	29. 991285
C	18. 363980	2. 402737	28. 914305
H	18. 149924	3. 374251	29. 352512
C	17. 472793	1. 849431	27. 992888
H	16. 568135	2. 373757	27. 697865
C	17. 751741	0. 599558	27. 442636
C	15. 271368	-1. 021779	27. 134293
H	14. 843735	-0. 193122	27. 708170
H	15. 439372	-1. 882966	27. 787113
C	12. 480308	-0. 895000	26. 156701
Cl	14. 640548	2. 036371	26. 043090
Cl	13. 739454	1. 051827	22. 855291
Ru	15. 530613	0. 392877	24. 425210
P	16. 413027	-0. 678301	22. 587583
P	16. 759260	-0. 350272	26. 227741
P	14. 210553	-1. 188092	25. 613267

Complex Ru, Cl cis, Phosphole cis, **5**:

E: -4309.3316

G: -4308.6626

H: -4308.5224

H	21.819057	6.129009	26.301300
C	19.920796	5.925785	25.308665
P	17.329211	5.674686	24.092359
C	18.123679	6.497441	22.618858
H	17.381064	7.206417	22.239101
Ru	16.341162	4.009643	22.698565
P	18.070460	4.982792	21.524571
C	19.864718	4.582743	21.397039
C	20.352844	4.828373	20.098182
C	21.709118	4.630671	19.821356
C	22.567036	4.206290	20.833651
C	22.082885	3.977140	22.123481
C	20.728801	4.163268	22.406632
C	20.835138	5.667109	26.330328
C	20.485798	4.827419	27.386357
C	19.220636	4.240303	27.413738
C	18.309865	4.489211	26.389811
C	18.648670	5.339999	25.327105
C	16.387213	7.004829	24.947541
C	14.991464	6.955433	25.023507
C	14.295150	7.983879	25.659554
C	14.978576	9.063787	26.213247
C	16.371258	9.116592	26.138890
C	17.072799	8.089502	25.514259
C	19.323666	5.312790	19.166419
C	18.055937	5.479678	19.760896
C	16.971237	5.924563	19.007524
C	17.158475	6.221715	17.656682
C	18.413071	6.064955	17.064516
C	19.496471	5.608923	17.812368
P	16.894681	1.815132	23.361241
C	18.240216	0.708217	22.727278
C	19.278591	1.184789	21.929070
C	20.255531	0.319583	21.429387
C	20.194648	-1.040090	21.717303

C	19. 154631	-1. 532396	22. 509470
C	18. 188803	-0. 667035	23. 012989
C	15. 438940	1. 088197	22. 434288
P	15. 264736	2. 526254	21. 251368
C	13. 524839	2. 643823	20. 713272
C	13. 378270	2. 230553	19. 373959
C	12. 114478	2. 261526	18. 780459
C	11. 019417	2. 707020	19. 518274
C	11. 176870	3. 132339	20. 838799
C	12. 434848	3. 110330	21. 443275
C	14. 641189	1. 817207	18. 742637
C	15. 758614	1. 915941	19. 597787
C	17. 029220	1. 581081	19. 140807
C	17. 192860	1. 126505	17. 831296
C	16. 089300	1. 020273	16. 983866
C	14. 816113	1. 366435	17. 432314
Cl	14. 456073	3. 594766	24. 244887
Cl	15. 030646	5. 887707	21. 816512
C	18. 027927	1. 055463	25. 805351
C	18. 032023	0. 599966	27. 121857
C	16. 831130	0. 284136	27. 756489
C	15. 629232	0. 432166	27. 067121
C	15. 621971	0. 890723	25. 750178
C	16. 823380	1. 201166	25. 100775
H	14. 550637	1. 089904	23. 070988
H	14. 460493	6. 119019	24. 582255
H	13. 210505	7. 937477	25. 715019
H	14. 429866	9. 863958	26. 704430
H	16. 911981	9. 954614	26. 572095
H	18. 158880	8. 130972	25. 479443
H	20. 211205	6. 587298	24. 497520
H	21. 196825	4. 631095	28. 185010
H	18. 939751	3. 580776	28. 230292
H	17. 327601	4. 023747	26. 413117
H	19. 095933	6. 987012	22. 725280
H	20. 352278	3. 971480	23. 407360
H	22. 758285	3. 648633	22. 909003
H	23. 621970	4. 057400	20. 616997
H	22. 100087	4. 816318	18. 824234
H	20. 467275	5. 484463	17. 339178
H	18. 547749	6. 296099	16. 010708
H	16. 318586	6. 573659	17. 063490
H	16. 000454	6. 036872	19. 481664

H	17. 889467	1. 667481	19. 796381
H	18. 183460	0. 860650	17. 472052
H	16. 222135	0. 669507	15. 963427
H	13. 965681	1. 284969	16. 760223
H	19. 328974	2. 240216	21. 695778
H	21. 060944	0. 718469	20. 818244
H	20. 951712	-1. 717124	21. 329444
H	19. 098771	-2. 593638	22. 739055
H	18. 976681	0. 486893	27. 648083
H	16. 832454	-0. 076042	28. 782301
H	14. 687137	0. 193717	27. 554207
H	14. 675575	1. 028074	25. 240682
H	15. 595982	0. 101352	21. 989596
H	11. 980226	1. 946532	17. 748672
H	10. 036014	2. 732494	19. 055141
H	10. 318371	3. 495080	21. 397880
H	12. 580488	3. 461969	22. 460203
H	17. 394103	-1. 061896	23. 641180
H	18. 972855	1. 285923	25. 320340